



TITLE:

I-4.時空構造のシミュレーションの 実際(『液体金属の構造と物性』,物 性研短期研究会報告)

AUTHOR(S):

竹内, 栄; 田中, 実; 福井, 芳彦; 渡部, 三雄; 長谷川, 正
之

CITATION:

竹内, 栄 ...[et al]. I-4.時空構造のシミュレーションの実際(『液体金属の
構造と物性』,物性研短期研究会報告). 物性研究 1971, 16(5): 634-636

ISSUE DATE:

1971-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88339>

RIGHT:

I-4. 時空構造のシミュレーションの実際

東北大金研 竹内 栄, 工学部. 田中 実, 福井芳彦
理学部. 渡部三雄, 長谷川正之

Rahman (Phys. Rev. 136, A405 (1964)) は, 古典力学に従い Lennard-Jones potential で相互作用をしている $N = 864$ 個の粒子について調べることによって, 温度 $T = 94.4^\circ \text{K}$, 密度 $\rho_m = 1.374 \text{ g/cm}^3$ の液体アルゴンに於ける Atom の運動のシミュレーションを行った。我々は新たな計算を始めるに当って, この Rahman のシミュレーションと比較することにより, 我々の計算方法そのものの適格性を check しておく必要があるのだろうと考え, 先ずアルゴンについての計算を試みた。以下に紹介するのはその方法の概略である。

Rahman の計算に於けると同様, 一辺の長さが L の立方体を考え, その中に質量 m がアルゴンの Atom と等しい $N = 864$ 個の粒子があるものとして ($L \equiv (Nm/\rho_m)^{1/3}$), $\Delta t = 10^{-14} \text{ sec}$ だけ時間が経つごとにそれらの粒子の位置を計算していく。周期性の境界条件についても Rahman と同様で, ある任意の時刻に立方体の中のある点に粒子が存在する場合には, その点から立方体の各辺の方向に L の整数倍だけそれぞれ並行移動した点 (一般には立方体の外部) にも, 他の粒子が必らず存在すると仮定する。

各々の粒子に作用する力は, 立方体の外部にある粒子も含めて, 周囲にある粒子から受ける二体力の和であるとし, その二体力は Lennard-Jones potential $V(r) = 4\epsilon [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ ($\epsilon/k_B = 120^\circ \text{K}$, $\sigma = 2.3 \times 10^{-8} \text{ cm}$) から導かれるものと仮定する。数値計算では粒子間力を求めるための計算に最も時間がかかるので, Rahman に従い, 粒子間距離が $R = 2.25\sigma$ を越えた場合にはそれ等の粒子間の力を無視することにした。即ち運動方程式は次の様な形である。

$$m \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \sum_j' \vec{F}(\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)).$$

但し Σ' は相対距離が R を越えない粒子に対する和を表わし、

$$\vec{F}(\vec{r}) \equiv -\nabla V(|\vec{r}|) \text{ である。}$$

この運動方程式によって数値解を求める方法は種々考えられるが、我々は差分法を用いた。即ち、時刻 $t = t_n$ (n を整数として $t_n \equiv t_0 + n \Delta t$, $\Delta t = 10^{-14}$ sec) に於て差分方程式

$$\begin{aligned} \frac{m}{(\Delta t)^2} [\vec{r}_i(t_{n+1}) - 2\vec{r}_i(t_n) + \vec{r}_i(t_{n-1})] \\ = \Sigma_j' \vec{F}(\vec{r}_i(t_n) - \vec{r}_j(t_n)) \end{aligned}$$

が成立するものとし、 N 個の粒子についての $\vec{r}_i(t_{n-1})$ と $\vec{r}_i(t_n)$ との値をもとにして $\vec{r}_i(t_{n+1})$ の値を計算するという方法を用いた。この方法では初期値として $\vec{r}_i(t_{-1})$ と $\vec{r}_i(t_0)$ との値を与えれば差分方程式によって $\vec{r}_i(t_1)$, $\vec{r}_i(t_2)$, \dots の数値が順次求められ、速度は

$$\vec{v}_i(t_0) = \frac{1}{2\Delta t} [\vec{r}_i(t_{n+1}) - \vec{r}_i(t_{n-1})] \text{ で計算される。}$$

$\vec{r}_i(t_0)$ に初期値を与えるには、先ず一辺の長さが L の立方体を $6 \times 6 \times 6$ 個の面心立方格子に分けて、その格子点 864 個にそれぞれ粒子を置き、次に各粒子をそれぞれ独立に勝手な方向へ 0.09σ だけ変位させて得られた場所を $\vec{r}_i(t_0)$ とした。変位の大きさは、粒子間の距離が σ 以下にならない範囲で適当に決めたものであり特別な意味は持たない。 $\vec{r}_i(t_{-1})$ については、 $\vec{r}_i(t_0)$ に置かれた粒子をそれぞれ独立に勝手な方向へ $(3k_B T/m)^{1/2} \Delta t$ だけ変位させて得られた場所が $\vec{r}_i(t_{-1})$ であるとして定めた。

この様にして差分方程式と初期値とで運動を決定された粒子系は、指定された密度 ρ_m を持っているが、初期値 $\vec{r}_i(t_{-1})$ 及び $\vec{r}_i(t_0)$ を決める時に勝手なエネルギーを与えられてしまうので、温度 $T = 9.4.4^\circ \text{K}$ でのシミュレーションとみなすことは出来ない。そこで、この系をある時間だけ熱源に接触させてエネルギーをやりとりさせる、という物理的な操作に対応するものとして、次の様に粒子の軌道の修正を行った。即ち、 $\vec{r}_i(t_{n+1})$ の値が求められた段階で系の運動エネルギーを計算して温度に換算したものを

$$T_n = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i^2(t_n)$$

とするとき、 $\vec{r}_i(t_{n+1})$ の値に $[(T/T_n)^{1/2} - 1] \vec{v}_i(t_n) \Delta t$ を加えたものを改めて $\vec{r}_i(t_{n+1})$ の値として採用し、以後の計算にはその値を用いることにした。

我々は時間にして 10^{-12} sec だけこのような修正を並用し、その後は差分方程式だけに従って粒子の位置を求めるという方針で計算を始めた。現在は $n = 10, 20, \dots, 70$ に対する $\vec{r}_i(t_n), \vec{v}_i(t_n)$ の値を Disk に記録しながら $n = 79$ までの計算を終った段階である。計算には日本電気の協力を得ることが出来て同社内の NEAC model 500 を使用した。計算に要する時間は n の値 1 個に対しておよそ 1.5×10^2 sec の程度である。

最後に、今回の計算でプログラム作成上有益な助言をして下さり、又、種々の便宜をはかって下さった日本電気株式会社情報処理システム部の真銅部長及び同部スタッフの方々に感謝の意を表する。